

Implémentation dans le code E. F. CAST3M de la méthode de changement d'échelles Transformation Field Analysis (TFA).

O. Fandeur¹, C. Guerin¹ et J.-F. Maire²

¹ CEA, DEN, DM2S, SEMT, LM2S, F-91191 Gif-sur-Yvette, France, olivier.fandeur@cea.fr, caroline.guerin@cea.fr

² ONERA, DMSC, MSC, FR-92322, Chatillon, France, jean-francois.maire@onera.fr

Résumé — La méthode de changement d'échelles Transformation Field Analysis a été implémentée dans le code éléments finis CAST3M. Les motivations de ce travail ainsi que les premiers tests de cette méthode sur le cas concret des composites SiC_f/SiC sont reportés.

Mots clefs — Changement d'échelles, Méthode TFA, CAST3M.

1 Introduction

Les modélisations multi-échelles permettent d'établir le lien entre la structure microscopique des matériaux et leurs comportements macroscopiques. On introduit ainsi plus de physique et, en étant plus représentatif de la réalité, il est possible d'être plus prédictif. Cette démarche est particulièrement utile dans le cas des matériaux dont la caractérisation est difficile (anisotropie), dont les propriétés sont évolutives (dégradation due, par exemple, à la corrosion, à l'irradiation) ou encore en voie de développement. Afin de réaliser de telles modélisations thermomécaniques, la méthode de changement d'échelles TFA, Transformation Field Analysis ([1],[2]), a été implémentée dans une version prototype du code éléments finis CAST3M [3]. Cette méthode permet de calculer une structure (échelle « globale ») tout en prenant en compte le comportement non linéaire de ses composants, dénommés sous-volumes ou sous-phases dans la méthode (échelle « locale ») et de suivre au cours du calcul leur évolution en plus de celle de la structure, donnant ainsi accès aux variations spatiales des champs locaux. Les champs d'application de cette méthode sont étendus et on peut envisager par exemple, outre la modélisation des composites, celle des alliages présentant différentes phases mais aussi des matériaux tels que le béton armé. Actuellement, il est possible de choisir le comportement de chaque composant parmi ceux disponibles dans le code CAST3M : plasticité, fluage, endommagement, etc. Les dilatations thermiques des composants peuvent aussi être prises en compte, ainsi que les déformations imposées telles que le gonflement, le retrait... Des tests de validation élémentaires (comparaison avec des résultats analytiques) ont été réalisés avec succès dans le cas de divers chargements et pour différentes lois de comportement. Dans cet article, après avoir décrit la méthode, nous illustrons ses possibilités en modélisant des composites SiC_f/SiC. Partant de résultats expérimentaux disponibles dans la littérature sur le fluage de micro-composites SiC_f/SiC et de leurs composants élémentaires, les vitesses de déformation en fluage ainsi que d'autres grandeurs calculées par la méthode TFA sont comparées aux valeurs issues de la littérature. Un calcul de structure consistant en une plaque trouée d'un composite SiC_f/SiC unidirectionnel en considérant un comportement endommageable pour la matrice et un comportement en fluage pour les fibres illustre aussi les possibilités apportées par cette méthode. Nous concluons sur les perspectives et prolongements de ce travail.

2 Rappel de la méthode Transformation Field Analysis

2.1 Notations

Les notations utilisées ici sont symboliques. Les tenseurs symétriques du deuxième ordre tel celui des déformations sont réduits à des matrices (6x1) et repérés par un soulignement simple, $\underline{\sim}$. Les tenseurs du quatrième ordre ayant au moins la symétrie $A_{ijkl} = A_{jikl} = A_{ijlk}$ sont réduits à des matrices

(6x6) repérées par un double soulignement $\underline{\underline{A}}$ et telles que $\underline{\underline{A}} \underline{\underline{A}}^{-1} = \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{A}} = I$ (I étant la matrice identité).

2.2 Description de la méthode

Les méthodes de changement d'échelles permettent, connaissant la loi de comportement dans les différents sous-volumes d'un volume (élémentaire) représentatif de calculer le comportement du matériau à l'échelle supérieure et de passer d'une échelle à l'autre (calcul des contraintes et déformations aux différentes échelles).

Pour la méthode TFA, les relations entre les champs de contraintes et de déformation globaux ($\underline{\underline{E}}, \underline{\underline{\Sigma}}$) et locaux dans le sous-volume indicé s ($\underline{\underline{\epsilon}}_s, \underline{\underline{\sigma}}_s$), ont été données par Dvorak [1, 2] et généralisés par Pottier [4] et J. L. Chaboche *et al.* [5].

$$\underline{\underline{\epsilon}}_{\sim r} = \underline{\underline{A}}_{\sim r} : \underline{\underline{E}} + \sum_{s=1}^N \underline{\underline{D}}_{\sim rs} : \underline{\underline{\epsilon}}_{\sim s}^{\text{an}} \quad (1)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}_{\sim r} = \underline{\underline{B}}_{\sim r} : \underline{\underline{\Sigma}} - \sum_{s=1}^N \underline{\underline{F}}_{\sim rs} : \underline{\underline{L}}_{\sim s} : \underline{\underline{\epsilon}}_{\sim s}^{\text{an}} \quad (2)$$

où $\underline{\underline{\epsilon}}_{\sim s}^{\text{an}}$ est la déformation inélastique (somme des déformations plastique, $\underline{\underline{\epsilon}}_{\sim s}^{\text{p}}$, thermique, $\underline{\underline{\epsilon}}_{\sim s}^{\text{th}}$, d'endommagement, $\underline{\underline{\epsilon}}_{\sim s}^{\text{d}}$) sur le sous-volume indicé s.

$$\underline{\underline{\epsilon}}_{\sim s}^{\text{an}} = \underline{\underline{\epsilon}}_{\sim s}^{\text{p}} + \underline{\underline{\epsilon}}_{\sim s}^{\text{th}} + \underline{\underline{\epsilon}}_{\sim s}^{\text{d}}$$

Dans (1) et (2) $\underline{\underline{L}}_{\sim s}$ est le tenseur d'élasticité initial s et $\underline{\underline{M}}_s = \underline{\underline{L}}_s^{-1}$ son inverse ($\underline{\underline{L}}_s^{-1} \underline{\underline{L}}_s = \underline{\underline{L}}_s \underline{\underline{L}}_s^{-1} = I$, I étant la matrice identité).

$\underline{\underline{A}}_{\sim r}$ et $\underline{\underline{B}}_{\sim r}$ sont respectivement les tenseurs de localisation de la déformation et de la contrainte. $\underline{\underline{D}}_{\sim ss}$, $\underline{\underline{D}}_{\sim rs}$, $\underline{\underline{F}}_{\sim ss}$ and $\underline{\underline{F}}_{\sim rs}$ sont respectivement les tenseurs d'influence des déformations et contraintes auto-induites (indices ss) et transmises (rs). Ils représentent l'influence d'une déformation (respectivement d'une contrainte), résultant d'un processus plastique, thermique ou d'endommagement dans le sous-volume s, sur la déformation (respectivement la contrainte) dans le sous-volume r.

2.3 Détermination des tenseurs de localisation et d'influence

Les tenseurs $\underline{\underline{A}}_{\sim r}$, $\underline{\underline{B}}_{\sim r}$, $\underline{\underline{D}}_{\sim rs}$ et $\underline{\underline{F}}_{\sim rs}$ peuvent être calculés numériquement. Pour les volumes (élémentaires) représentatifs tridimensionnels quelconques, six calculs élastiques sont nécessaires afin d'évaluer le tenseur $\underline{\underline{A}}_{\sim r}$ ou $\underline{\underline{B}}_{\sim r}$, étant donné qu'il est nécessaire d'imposer les 6 composantes du tenseur des déformations. De la même façon, 6xN calculs (où N est le nombre de sous-volumes dans le volume représentatif) sont nécessaires pour calculer les tenseurs d'influence.

Dans le cas d'un VER constitué de deux sous-volumes correspondant chacun à une phase (α et β), les tenseurs d'influence s'expriment analytiquement de façon exacte en fonction des matrices d'élasticité des deux sous-volumes $\underline{\underline{L}}_{\sim s}$ et $\underline{\underline{M}}_{\sim s}$ des sous phases et des tenseurs de localisation $\underline{\underline{A}}_{\sim r}$, $\underline{\underline{B}}_{\sim r}$.

Certaines approximations, telles que l'approximation de Mori-Tanaka [1] (adaptée au cas d'inclusions alignées de formes similaires) et l'approximation de Roos *et al.* [6] (adaptée aux systèmes lamellaires), permettent d'obtenir une expression analytique des tenseurs de localisation et en conséquence d'obtenir une expression analytique de l'ensemble des tenseurs nécessaires à la méthode. Des procédures basées sur ces approximations ont été développées dans CAST3M.

3 Implémentation de la méthode dans CAST3M

Les tenseurs de localisation $\underset{\approx r}{A}$ et d'influence $\underset{\approx rs}{D}$ sont calculés en prétraitement pour le volume représentatif considéré.

L'état du système à l'instant initial, t_0 , est supposé connu. On désire calculer la contrainte macroscopique, $\underset{\sim}{\Sigma}$, à l'instant $(t_0 + \Delta t)$ à partir de l'estimation de la déformation macroscopique à ce même instant, $\underset{\sim}{E} + \Delta \underset{\sim}{E}$.

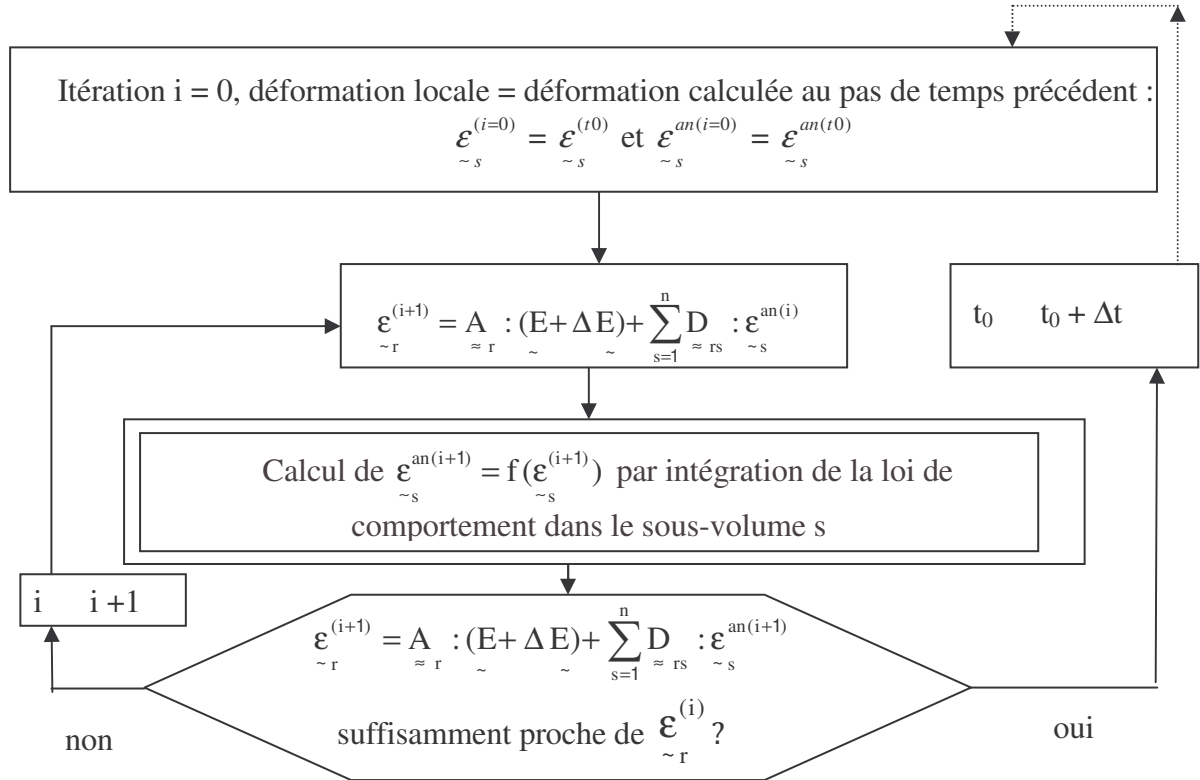


FIG. 1 – Algorithme (local) de t_0 à $t_0 + \Delta t$

Pour ce faire, on procède au calcul de la déformation dans chaque sous-volume à $(t_0 + \Delta t)$, selon la loi de localisation de la méthode :

$$\underset{\sim r}{\epsilon} = \underset{\approx r}{A} : (\underset{\sim}{E} + \Delta \underset{\sim}{E}) + \sum_{s=1}^N \underset{\approx rs}{D} : \underset{\sim s}{\epsilon}^{an}$$

La déformation du sous-volume r , $\underset{\sim r}{\epsilon}$, est fonction des déformations anélastiques de l'ensemble des

sous-volumes, ε_s^{an} ($s = 1$ à n), elles-mêmes fonction de l'état recherché. Il est donc nécessaire d'effectuer un schéma itératif englobant l'intégration de la loi de comportement dans chaque sous-volume. Un organigramme de ce schéma est donné à la figure 1. Cette intégration a été réalisée dans le sous-programme UNPAS de CAST3M.

4 Calcul multi-échelles du fluage de micro-composites en SiC_f/SiC

L'implémentation de la méthode TFA a été testée dans le cas des composites SiC_f/SiC, candidats pour constituer des pièces de structure des réacteurs de fusion et les gaines des combustibles de réacteurs haute température. Ceci a été réalisé en comparant les résultats obtenus par le calcul, d'une part, à des résultats expérimentaux et, d'autre part, à des résultats de calcul via la règle des mélanges tous issus des travaux de Rugg *et al.* [7]. Notons que la comparaison de la méthode TFA avec la loi des mélanges n'est réalisée qu'à titre d'illustration étant donné que les objectifs et les applications de ces méthodes sont différentes (calculs éléments finis multi-échelles pour la TFA et méthode analytique pour le calcul de propriétés unidirectionnelles pour la loi des mélanges).

Rugg *et al.* ont réalisé des essais de fluage sur des micro-composites constitués d'une seule fibre dans une matrice CVI pour deux types de fibres (Hi-Nicalon et carborundum). Ces expériences présentent l'avantage d'avoir été réalisées sur des échantillons ayant des matrices non-fissurées. De plus, les auteurs donnent les lois de fluage pour chaque composant. Les tenseurs de localisation et d'influence utilisés pour les calculs TFA sont obtenus grâce à l'approximation de Mori-Tanaka pour des inclusions cylindriques (fibres).

La déformation de fluage ε de chaque constituant fibre (f) et matrice (m) s'exprime d'après :

$$\varepsilon_{f,m} = \frac{\sigma}{E} + A \sigma^n t^p e^{\frac{-P}{T}} \quad (3)$$

Où σ est la contrainte appliquée, t le temps, T la température absolue, E le module d'Young, n l'exposant de la contrainte de fluage, p l'exposant du temps de fluage et $P = pQ/R$, Q étant l'énergie d'activation et R la constante des gaz. Les paramètres pour les différents composants sont donnés dans la référence de Rugg *et al.* [1].

La figure 2 indique en couleur les évolutions de la déformation de fluage avec le temps calculées à partir de (3) et en noir et blanc avec des symboles celles obtenues expérimentalement. Ces figures donnent une estimation de l'écart entre les calculs à partir de la loi ajustée et les résultats expérimentaux. On voit que à 1300 °C et pour les valeurs de contraintes indiquées sur les légendes, l'utilisation des lois de fluage ajustées conduit à une surestimation des déformation de fluage des fibres et une sous-estimation de celle des matrices.

La figure 3 indique la déformation de fluage en fonction du temps à 1300 °C et sous un chargement de 100 MPa pour les micro-composites Hi Nicalon H3-11A et carborundum C5. Les symboles noirs correspondent à l'expérience, les courbes noires aux calculs suivant la loi des mélanges et les courbes de couleurs aux résultats obtenus par CAST3M en utilisant la méthode TFA. On peut observer une bonne concordance des résultats dans le cas du micro-composite en carborundum. Pour le micro-composite Hi-Nicalon, les déformations calculées à l'aide de la méthode TFA sont plus importantes que les déformations expérimentales et celles obtenues par la loi des mélanges le sont moins. L'évolution temporelle des contraintes reportée figure 4 pour ces deux micro-composites montre encore un bon accord dans le cas du carborundum. Pour ce micro-composite, la contrainte élastique initiale est égale à la contrainte appliquée de 100 MPa dans la fibre et la matrice, étant donné que ces composants ont le même module élastique. La vitesse de fluage de la matrice est plus importante que celle de la fibre, ainsi la contrainte décroît dans la matrice et croît dans la fibre.

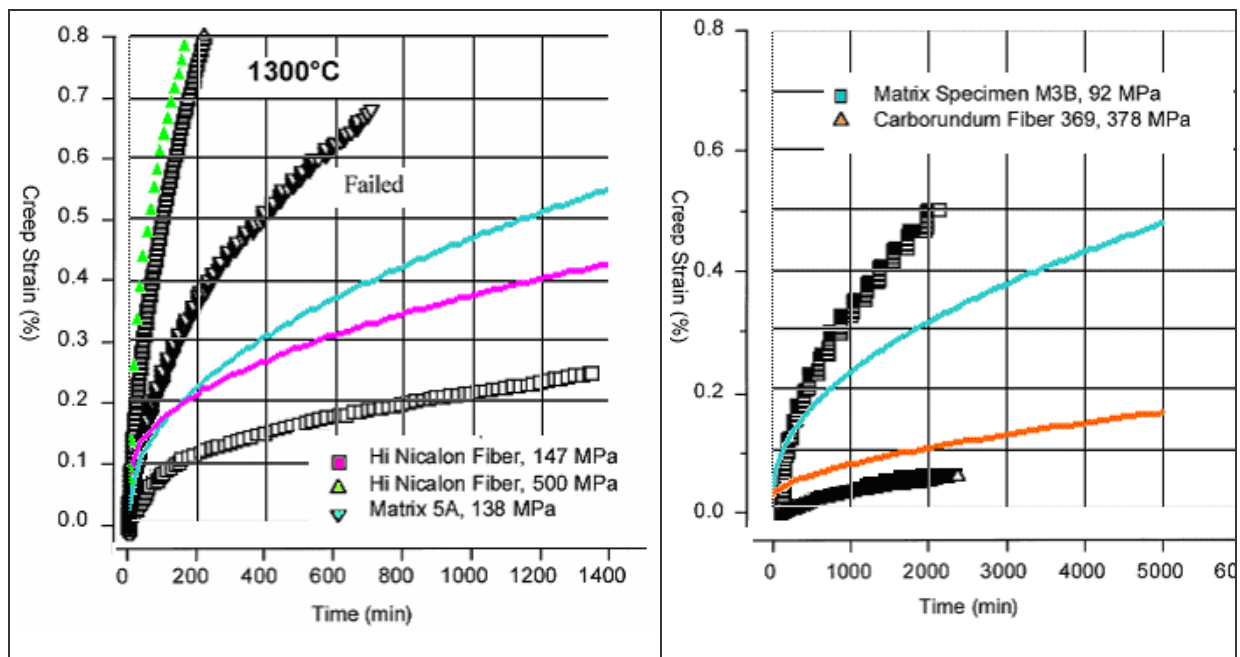


FIG. 2 – Comparaison des déformations de fluage des fibres et matrice SiC calculées analytiquement (courbes en couleurs) et expérimentales (symboles) [7].

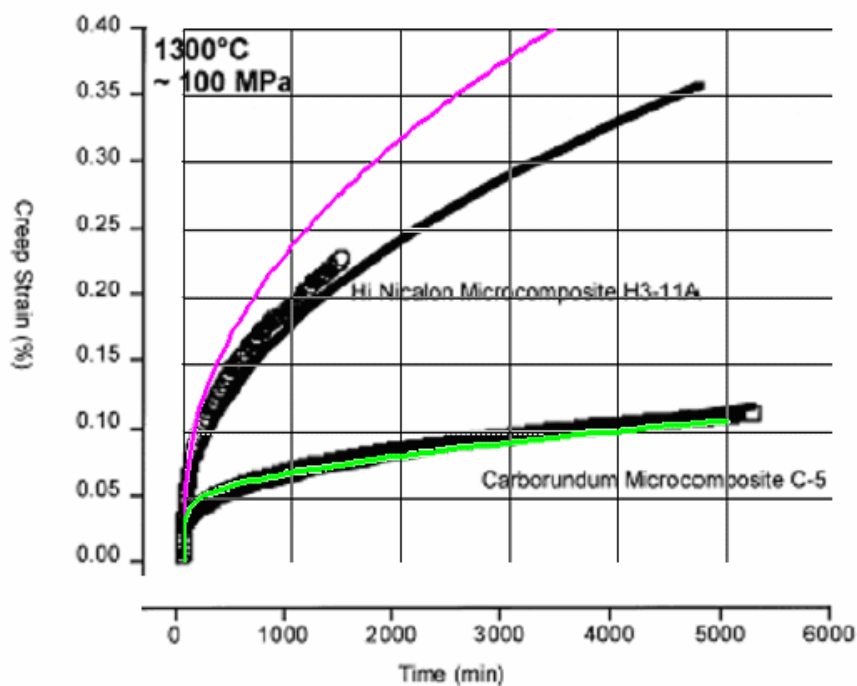


FIG. 3 – Comportement en fluage des composites HI NICALON H3-11A et carborundum C5. Comparaison des déformations de fluage calculées par la méthode TFA (courbes en couleurs), expérimentales (symboles) [7] et via la loi des mélanges (courbes noires).

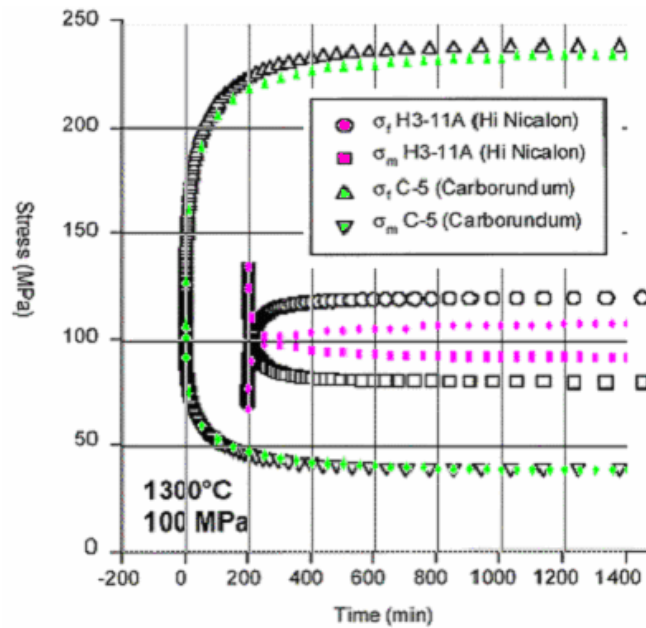


FIG. 4 – Contrainte dans la matrice et dans la fibre pour les micro-composites HI NICALON H3-11A et carborundum C5. Les symboles noirs correspondent à la loi des mélanges tandis que les symboles colorés correspondent aux calculs TFA.

Pour le micro-composite Hi-Nicalon, les modules élastiques différents dans la fibre et la matrice conduisent à une contrainte initialement plus élevée dans la matrice. Néanmoins, la matrice qui flue plus que la fibre transfère sa contrainte sur cette dernière. Les différences de contraintes entre la fibre et la matrice calculées par la méthode TFA sont moins importantes que celles calculées à l'aide de la loi des mélanges. D'autres comparaisons avec les calculs de Rugg *et al.* [7] ont été réalisées notamment en considérant des variations de la vitesse de fluage de la matrice, la fraction volumique de fibre et de la température. On peut conclure de ces comparaisons que la méthode TFA conduit à des estimations satisfaisantes des différentes grandeurs. En effet, les écarts entre les déformations expérimentales et calculées par la méthode TFA sont du même ordre de grandeur que ceux entre les déformations expérimentales des constituants et celles calculées par les lois de fluages utilisées. Les contraintes et déformations calculées par la loi des mélanges et la méthode TFA, et leurs variations sont proches.

5 Calcul d'une structure de composite

Un exemple de calcul d'une structure composite SiCf/SiC – plaque trouée soumise à une contrainte de traction de 200 MPa selon la direction des fibres (z) et portée à 1400 °C – a été réalisé avec la méthode TFA en considérant deux types de comportement différents pour les composants du SiCf/SiC. On a considéré que les fibres fluent suivant la loi donnée dans la référence [8] (fibres Hi-Nicalon) et que la matrice s'endommage selon le modèle pseudo-tensoriel développé par l'ONERA [9, 10]. La figure 5 montre, après 20 000 secondes de fluage, la répartition, au sein de la plaque trouée, de la composante des déformations ϵ_{yy} dans la matrice (à gauche) et dans la fibre (à droite). L'étude des contraintes indique que les fibres supportent une contrainte plus importante que la matrice. Les composantes, d_i , de la variable décrivant l'endommagement dans la matrice sont représentées figure 6. Les indices de ces composantes indiquent les directions i ($i=1,2,3$ soit $i=x,y,z$) perpendiculaires au plan de fissuration tandis que d_4 and d_5 correspondent respectivement à la fissuration dans le plan (x,y) à 45 ° à -45° de l'axe x.

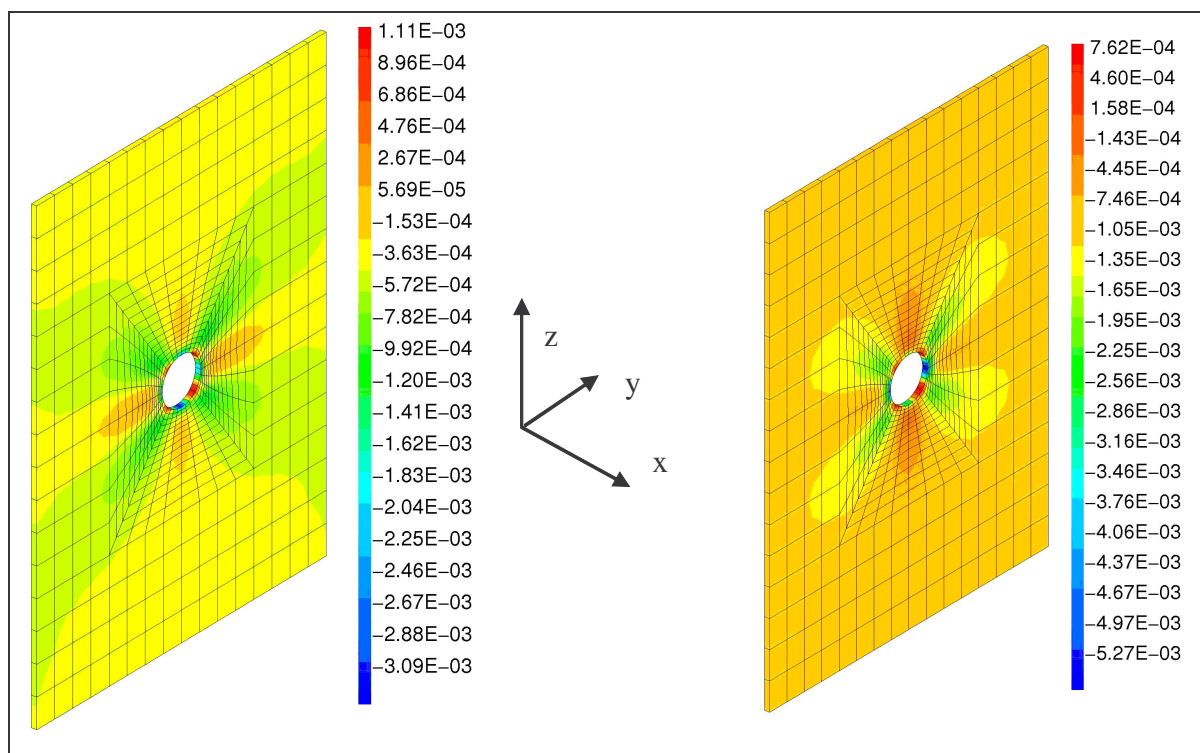


FIG. 5 – Plaque de composite SiC_f/SiC soumise à une traction de 200 MPa à la température de 1400 °C. Composante ϵ_{yy} de la déformation : dans la matrice (comportement endommageable) à gauche et dans la fibre (comportement de fluage) à droite.

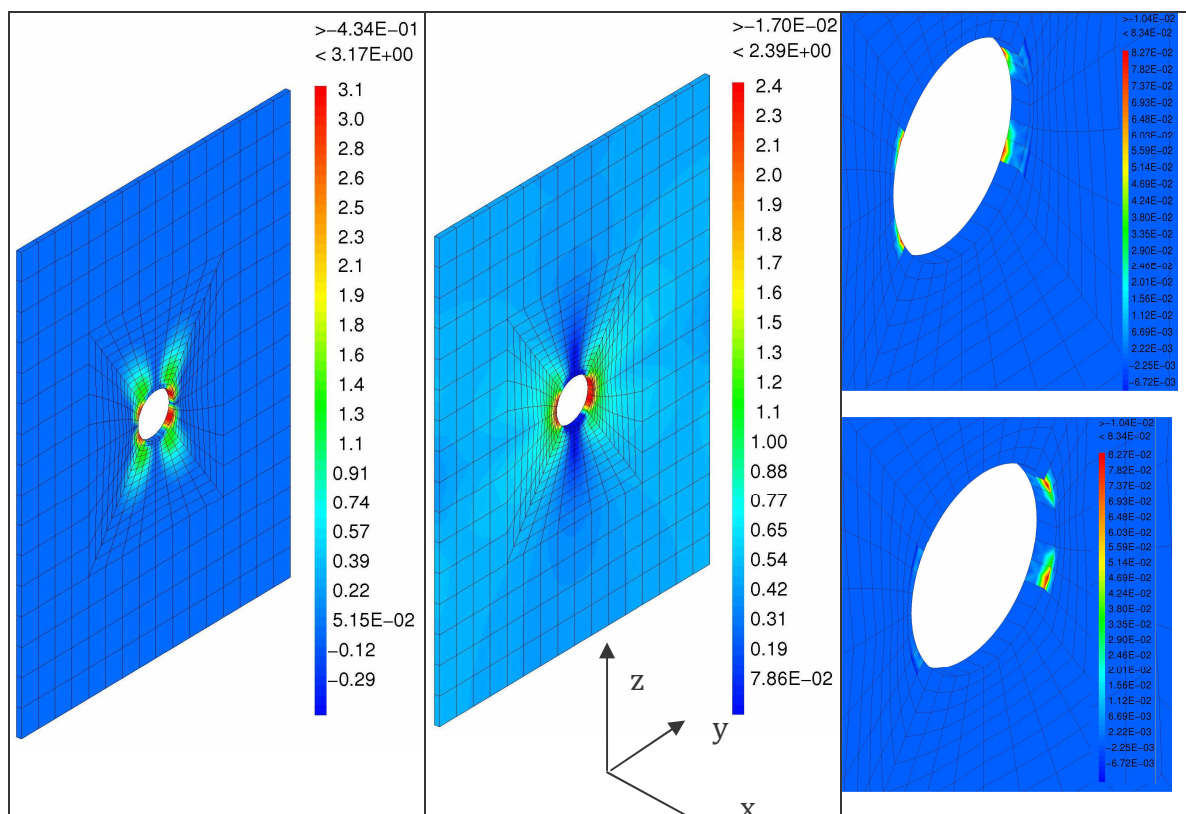


FIG. 6 – Champ des variables décrivant, de gauche à droite et de bas en haut, l'endommagement : d_2, d_3, d_4, d_5, d_1 étant uniformément nul.

6 Conclusion et perspectives

La méthode de changement d'échelle TFA qui permet de modéliser les comportements inélastiques des sous-volumes ou sous-phases constituant un matériau et de disposer, lors de calculs des structures, de l'ensemble des variables, tant à l'échelle globale qu'à l'échelle locale, a été implémentée dans le code CAST3M. Les calculs réalisés sur les composites SiC_f/SiC reportés dans cet article illustrent les possibilités de cette méthode. Les évolutions à venir concernent, notamment le développement d'outils permettant le calcul des tenseurs d'influence et de localisation nécessaires à l'utilisation de la méthode TFA pour des volumes représentatifs quelconques et définis par l'utilisateur. On envisage aussi d'implémenter dans CAST3M la méthode généralisée de la TFA [5], qui permet de prendre en compte les variations dans les tenseurs d'élasticité des composants dus à l'endommagement, sans recalculer à chaque itération les tenseurs de localisation et d'influence.

Références

- [1] G.J. Dvorak, *Transformation field analysis of inelastic composite materials*, Proc. Roy Soc. Lond. A., The Royal Society, vol. A437, pp.311-327, 1992.
- [2] G.J. Dvorak, Y. Benveniste, *On transformation strains and uniform fields in multiphase elastic media*, Proc. Roy. Soc. Lond. A, The Royal Society, vol. A437, pp.291-310, 1992.
- [3] <http://www-cast3m.cea.fr/cast3m/index.jsp>
- [4] T. Pottier, *Modélisation multiéchelle du comportement et de l'endommagement de composites à matrice métallique*, Thèse de doctorat de l'Ecole nationale des ponts et chaussées, 1998.
- [5] J.L. Chaboche, S. Kruch, J.F. Maire, T. Pottier, *Toward a micromechanics based inelastic and damage modelling of composites*, Int. Journ. of Plasticity 17, Pergamon Elsevier, 411-439, 2001.
- [6] A. Roos, J.L. Chaboche, L. Gélébart and J. Crépin, *Multi-scale modelling of titanium aluminides*, International Journal of Plasticity, Volume 20, issues4-5, Elsevier, pages 811-830, April-May 2004.
- [7] K.L. Rugg, R.E. Tressler, C.E. Bakis and J. Lamon, *Creep of SiC-SiC Micro-composites*, Journal of the European ceramic society 19, Elsevier, 2285-2296, 1999.
- [8] C. Sauder and J. Lamon, *'Tensile creep behaviour of SiC Based fibers with a low oxygen content'*, J. Am. Ceram. Soc. 90 [4] 1146-1156, 2007.
- [9] J.F. Maire and J.L. Chaboche, *'A new formulation for continuum damage mechanics (CDM) for composite materials'*, Aerospace Science and Technology, v.1, pp. 247-257, 1997.
- [10] L. Marcin, N. Carrere, F. Laurin, A. Mouret, E. Martin et J.F. Maire, *'Stratégies de calculs robustes pour l'étude de la tenue de structures CMC'*, 15èmes journées Nationales sur les composites-JNC15, Marseille, France, 6-9-8 juin 2007.